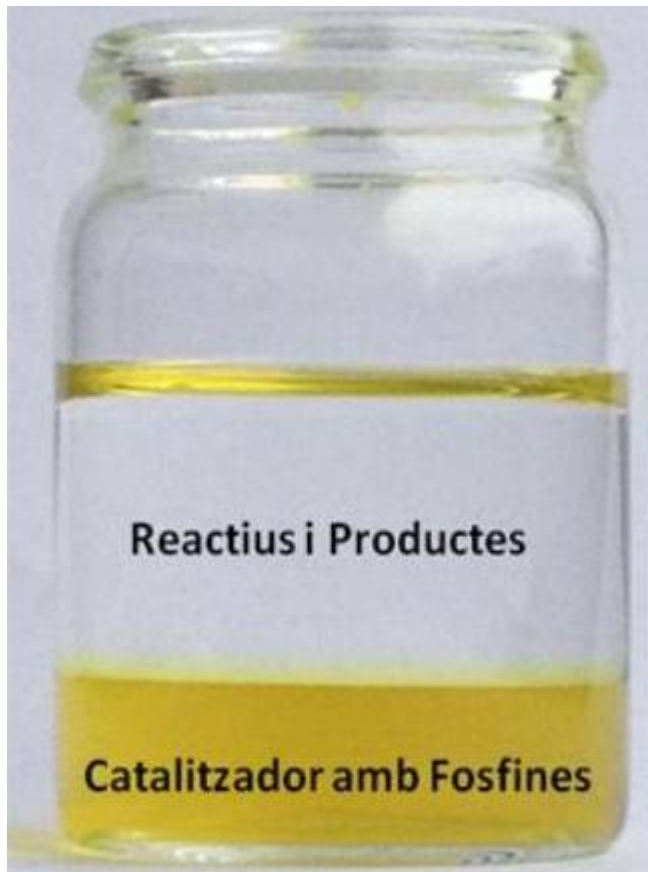


Patentades unes fosfines per processos de Química Verda

12/2013 - Química. Els catalitzadors són substàncies que augmenten la velocitat de les reaccions químiques en les quals participen i que són utilitzats en la majoria dels productes químics manufacturats. D'entre els més utilitzats es troben els que es basen en metalls de transició. La UAB ha patentat uns nous lligands fosfina sintetitzats en una tesi doctoral que permeten preparar un nou tipus de catalitzadors per processos de Química Verda. Aquests catalitzadors són solubles en aigua, la qual cosa permet la seva reutilització, i són més efectius que els descrits prèviament.



Un catalitzador és una substància que participa en una reacció química, augmentant la seva velocitat, però regenerant-se al final de la reacció. Per aquest motiu, un mateix catalitzador pot accelerar un nombre elevat de reaccions químiques abans de desactivar-se. D'altra banda, mitjançant la selecció del catalitzador adient, és possible dirigir selectivament una reacció química cap al producte desitjat, sense subproductes, és dir, amb economia atòmica completa o molt elevada. Es redueixen, d'aquesta forma, residus i s'estalvia energia, com es requereix en processos de baix impacte mediambiental compatibles amb la Química Verda.

La disciplina que estudia els catalitzadors i les reaccions catalitzades és la catàlisi. La catàlisi és una àrea crucial en la indústria química moderna i també, com a conseqüència, en el desenvolupament d'una societat sostenible. Avui dia, en la preparació de la major part dels productes químics manufacturats (adobs, fàrmacs, agroquímics, plàstics, detergents, etc.) s'utilitza com a mínim un catalitzador.

Existeixen diferents tipus de catalitzadors i, entre aquests, els catalitzadors homogenis basats en metalls de transició són uns dels més desenvolupats en les darreres dècades, a causa de la seva aplicació en l'obtenció de multitud de productes químics essencials per a la nostra vida quotidiana. No obstant, la principal limitació dels processos homogenis és la dificultat de separació del catalitzador, que es troba en la mateixa fase que els productes de reacció, la qual cosa encareix el procés de purificació dels productes.

En la present tesi doctoral s'han sintetitzat una sèrie de nous lligands fosfina que permeten estabilitzar complexos de metalls de transició, per ser utilitzats com a catalitzadors (figura 1). Les triarilfosfines sintetitzades presenten unes característiques electròniques especials, gràcies a la incorporació de grups trifluorometil en la seva estructura, que modifiquen l'activitat i la selectivitat de diferents reaccions catalítiques i augmenten significativament la seva resistència a l'oxidació, quan se les compara amb fosfines similars. A més, s'han introduït grups sulfonat que confereixen solubilitat en aigua als catalitzadors preparats amb aquestes fosfines, el que permet dur a terme processos catalítics bifàsics líquid-líquid.

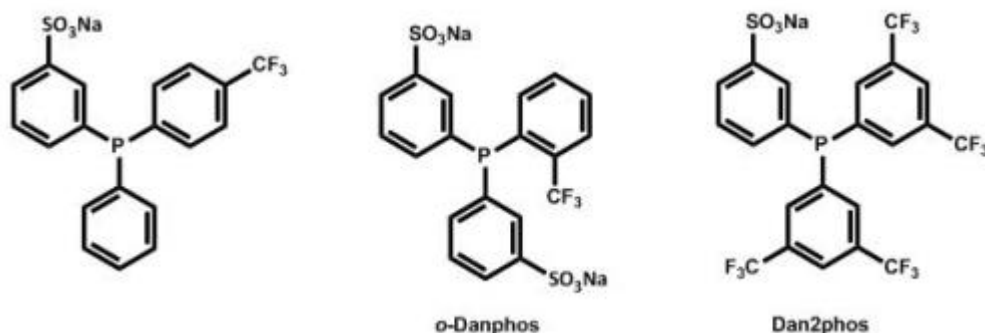


Figura 1. Estructura d'algunes fosfines trifluorometilades i sulfonades.

En aquests tipus de processos catalítics, el substrat i els productes es troben dissolts en una fase immiscible amb la fase on es troba dissolt el catalitzador (figura 2). Durant la reacció les dues fases són agitades enèrgicament per maximitzar les interfases, afavorint la interacció dels catalitzadors amb el substrat, però al final de la reacció és possible separar els productes del catalitzador i en alguns casos dur a terme reaccions de reciclatge. Aquests processos permeten mantenir la selectivitat pròpia dels complexos moleculars i la fàcil separació dels catalitzadors heterogenis.

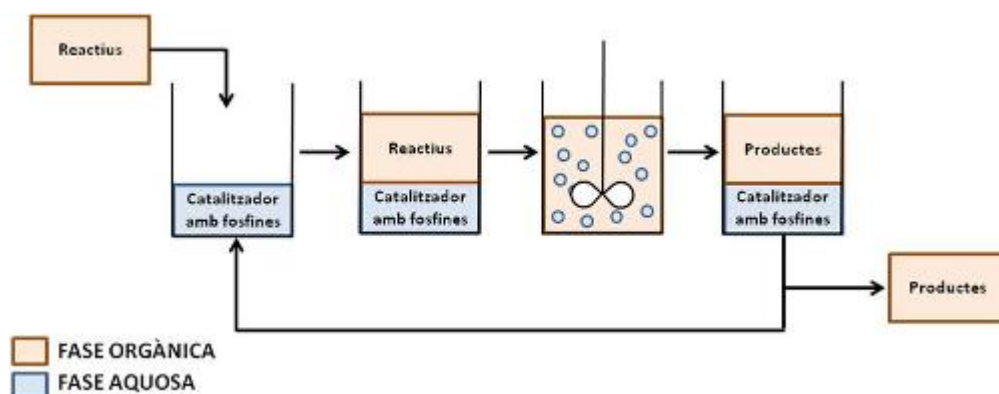


Figura 2. Sistema catalític bifàsic líquid-líquid.

Les fosfines sintetitzades s'han avaluat com a lligands en diversos processos catalítics de carbonilació (metoxycarbonilació, hidroxicarbonilació i hidroformilació), reducció (hidrogenació i transferència d'hidrogen de dobles enllaços) i acoblaments carboni-carboni (Suzuki-Miyara i Tsuji-Trost). D'entre totes les reaccions assajades, la hidroformilació de substrats polars és la reacció on les noves fosfines sintetitzades presenten una millora substancial respecte les fosfines sulfonades prèviament descrites, pel que fa a la velocitat de les reaccions. A més, les fosfines sulfonades trifluorometilades permeten reciclar el catalitzador mitjançant sistemes bifàsics.

El desenvolupament dels lligands sintetitzats a la tesi doctoral ha estat reivindicat en forma de patent per la Universitat Autònoma de Barcelona¹. Actualment, algunes de les fosfines sintetitzades són disponibles al catàleg comercial de l'empresa química Strem Chemicals Inc. sota llicència de la UAB².

¹Peral Crespo, D.; Bayón Rueda, J.C., PCT Int. Appl. WO 2011045417, 2011, Universitat Autònoma de Barcelona.

²Strem Chemicals, Inc. [fitxer en línia]:

http://www.strem.com/catalog/index.php?focus=product&keyword=danphos&x=41&y=6&page_function=keyword_search. [consulta: 12 desembre 2013].

Daniel Peral Crespo

Departament de Química

"Triarilfosfines Sulfonades Trifluorometilades. Aplicacions en Processos Catalítics", tesi doctoral de Daniel Peral Crespo, dirigida pel Dr. Joan Carles Bayón Rueda i llegida al Departament de Química de la UAB.